

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Говорухин В.Н., Моргулис А.Б., Тютюнов Ю.В.* Медленный таксис в модели хищник-жертва // Докл. РАН. – 2000. – С. 372, N 6. – С.730 - 732.
2. *Латун В.С.* Устойчивость системы фитопланктон-зоопланктон-рыба // Экологическая безопасность прибрежной и шельфовой зон и комплексное использование ресурсов шельфа. – Севастополь, 2004. – Вып. 10. – С. 211 – 218.
3. *Латун В.С.* Учет кормового таксиса хамсы в математической модели системы фитопланктон-зоопланктон-рыба // Морской экологический журнал. 2005. N 4. Т. IV. 2005. С.49-60.

Никитина Алла Валерьевна

Технологический институт федерального государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Южный федеральный университет» в г. Таганроге;

E-mail: nikitina.vm@gmail.com

347928, Россия, Таганрог, ГСП 17А, пер. Некрасовский, 44

Тел.: 8(8634) 37-16-06

Nikitina Alla Valerievna

Taganrog Institute of Technology - Federal State-Owned Educational Establishment of Higher Vocational Education "Southern Federal University"

E-mail: nikitina.vm@gmail.com

44, Nekrasovsky, Taganrog, 347928, Russia, Ph.: +7(8634)37-16-06

УДК 519.86

А.И. Сухинов, В.К. Гадельшин, Д.С. Любомищенко

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ
ВРЕДНЫХ ПРИМЕСЕЙ В АТМОСФЕРЕ ГОРОДА НА ОСНОВЕ
ИОСВ МЕТОДА²**

В данной работе рассмотрен подход моделирования загрязнения окружающей среды от автотранспортных средств на основе уравнений, записанных в универсальной форме, позволяющий существенно упростить процесс компьютерного моделирования. Численная реализация схемы построена с использованием метода контрольного объема. Вычислительный эксперимент выполняется на кластере распределенных вычислений.

SIMPLE – метод; моделирование распространения загрязнения; параллельное программирование.

A.I. Sukhinov, V.K. Gadelshin, D.S. Lyubomishchenko

**MATHEMATICAL MODELING OF DISTRIBUTION OF
POLLUTION IN CITY ATMOSPHERE BASED ON IOCV-METHOD**

² Работа выполнена по гранту РНПВШ 2.1.1/6584

In the paper an approach for pollution modeling from motor transport is developed. It based on equations written at universal form what allows to simplify the modeling process. The numerical realization is based on control volume method and performed on distributed memory cluster.

SIMPLE-method; pollution modeling; parallel programming.

Задача оценки загрязнения воздушной среды города становится все более актуальной из-за постоянного роста количества загрязнителей. Автомобильный транспорт и промышленные предприятия вносят наиболее существенный вклад в неблагоприятную картину загрязнения современного города с развитой промышленной и автодорожной инфраструктурой. В связи с этим возникает необходимость оперативной оценки загрязнения атмосферы города для контроля и выработки рекомендаций по нормализации уровня выбросов. Математическое моделирование является одним из наиболее приемлемых способов решения поставленных задач.

В данной работе предложена математическая модель расчета уровня загрязнения города. Модель основывается на системе уравнений Навье-Стокса и уравнении конвекции-диффузии, записанных в форме уравнений переноса универсального вида. Данный подход позволяет упростить процесс моделирования за счет использования универсальных численных алгоритмов для всех уравнений системы.

Запишем базовую трехмерную систему уравнений в форме универсального уравнения переноса для переменной Φ [1, 2, 6]:

$$\frac{\partial(\rho_m \Phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_m u_{jj} \Phi)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\Gamma_{eff} \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \right] + S_\Phi. \quad (1)$$

Значения коэффициентов для разных уравнений приведены в табл. 1:

Таблица 1

Значения коэффициентов для различных типов уравнений

Φ	Γ_{eff}	S_{eff}	№ формулы
1	0	0	(2)
u_i	μ_{eff}	$-\partial p / \partial x_i + S_{u_i}$	(3)
T	k_{eff} / C_{pm}	Q''' / C_{pm}	(4)

В формулах (1) – (4) ρ – плотность среды, μ_{eff} – эффективная вязкость, p – давление, u_i – компоненты вектора скорости в направлении трех координатных осей, u_{jj} – компоненты вектора скорости в направлении трех координатных осей, удовлетворяющие дискретному аналогу уравнения неразрывности (2).

Далее для построения численного [6] метода будем рассматривать универсальное уравнение (1). Данное уравнение удобно представить в виде (5):

$$\frac{\partial(\rho \Phi)}{\partial t} + \frac{\partial q_1}{\partial x_1} + \frac{\partial q_2}{\partial x_2} + \frac{\partial q_3}{\partial x_3} = S, \quad (5)$$

где q_j – совместный конвективно-диффузионный поток в направлении j :

$$q_j = \rho u_{jj} \Phi - \Gamma_{eff} \frac{\partial \Phi}{\partial x_j}, \quad j = \overline{1, 3}. \quad (6)$$

Применим к уравнению (5) метод дискретизации, основанный на интегрировании по контрольному объему (ИОСВ).

$$\begin{aligned} & \left[(\rho\Phi)_P - (\rho\Phi)_P^0 \right] \Delta x \Delta y \Delta z + \left[(J_x)_e - (J_x)_w \right] \Delta t + \left[(J_y)_n - (J_y)_s \right] \Delta t + \left[(J_z)_t - (J_z)_b \right] \Delta t = \\ & = Su \Delta t \Delta x \Delta y \Delta z + Sp \Phi_P \Delta t \Delta x \Delta y \Delta z \end{aligned} \quad (7)$$

В левой части уравнения (7) J представляют собой потоки через соответствующие грани контрольного объема. Для простоты опустим индексы координатных направлений у J . Определим J в точках w, e, s, n, b и t :

$$\begin{aligned} J_w &= D_w [B_w \Phi_w - A_w \Phi_P], & J_e &= D_e [B_e \Phi_P - A_e \Phi_E], \\ J_s &= D_s [B_s \Phi_S - A_s \Phi_P], & J_n &= D_n [B_n \Phi_P - A_n \Phi_N], \\ J_b &= D_b [B_b \Phi_B - A_b \Phi_P], & J_t &= D_t [B_t \Phi_P - A_t \Phi_T]. \end{aligned} \quad (8)$$

На рис. 1 представлено расположение узлов и граней соседних контрольных объемов.

Коэффициенты A и B в (8) определяют специфику потока через грани контрольного объема и определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} A(P) &= A(|P|) + \max(-P, 0) \\ B(P) &= A(|P|) + \max(P, 0) \end{aligned} \quad (9)$$

В формуле (9) P – число Пекле, $A(|P|)$ – функция, определяемая из условий движения среды в рассматриваемой задаче. Число Пекле определяется по формуле:

$$P = F/D,$$

где F – конвективная составляющая потока, D – диффузионная составляющая потока.

Значения F и D для точек w, e, s, n, b и t представлены формулами:

$$\begin{aligned} F_w &= (\rho u)_w \Delta y \Delta z, & F_e &= (\rho u)_e \Delta y \Delta z, \\ D_w &= \Gamma_w / \delta x_w \Delta y \Delta z, & D_e &= \Gamma_e / \delta x_e \Delta y \Delta z, \\ F_s &= (\rho u)_s \Delta x \Delta z, & F_n &= (\rho u)_n \Delta x \Delta z, \\ D_s &= \Gamma_s / \delta x_s \Delta x \Delta z, & D_n &= \Gamma_n / \delta x_n \Delta x \Delta z, \\ F_b &= (\rho u)_b \Delta x \Delta y, \\ F_t &= (\rho u)_t \Delta x \Delta y, \\ D_b &= \Gamma_b / \delta x_b \Delta x \Delta y, \\ D_t &= \Gamma_t / \delta x_t \Delta x \Delta y. \end{aligned} \quad (10)$$

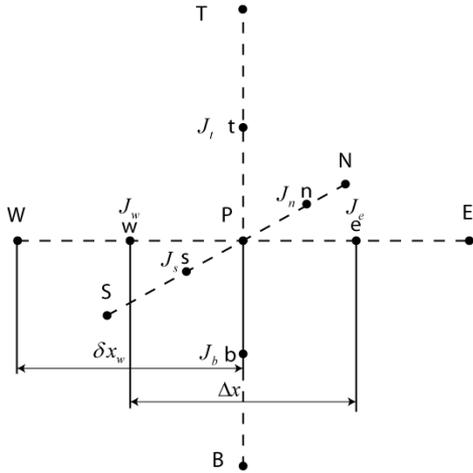


Рис. 1. Схема расположения узлов и граней соседних контрольных объемов

Функция $A(|P|)$ вводится в схему для корректной аппроксимации конвективных членов исходного уравнения. В табл. 2 представле-

ны возможные варианты для $A(|P|)$.

Таблица 2

Способы задания $A(|P|)$

Схема аппроксимации	Значения $A(P)$
Центрально-разностная	$1 - 0.5 P $
Противопоточная	1
Степенная	$\max\left(0, (1 - 0.5 P)^5\right)$

После подстановки в (9) значений (10) получим выражение вида

$$\Phi_P \left[\frac{\rho_P \Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} + a_E + a_W + a_N + a_S + Sp \Delta x \Delta y \Delta z + F_e - F_w + F_n - F_s + F_t - F_b \right] =$$

$$= \Phi_W a_W + \Phi_E a_E + \Phi_S a_S + \Phi_N a_N + \Phi_B a_B + \Phi_T a_T + Su \Delta x \Delta y \Delta z + \Phi_P^0 \left[\frac{\rho_P^0 \Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} \right]. \quad (11)$$

Проинтегрируем уравнение неразрывности (2) по контрольному объему с центром в точке P:

$$\frac{\rho_P - \rho_P^0}{\Delta t} \Delta x \Delta y \Delta z + F_e - F_w + F_n - F_s = 0. \quad (12)$$

Теперь вычтем из (11) (12), умноженное на Φ_P . После приведения подобных и введения новых обозначений получим:

$$a_P \Phi_P = a_W \Phi_W + a_E \Phi_E + a_S \Phi_S + a_N \Phi_N + a_B \Phi_B + a_T \Phi_T + b, \quad (13)$$

$$a_W = A(|P_w|) + \max(F_w, 0), a_E = A(|P_e|) + \max(-F_e, 0),$$

$$a_S = A(|P_s|) + \max(F_s, 0), a_N = A(|P_n|) + \max(-F_n, 0), \quad (14)$$

$$a_B = A(|P_b|) + \max(F_b, 0), a_T = A(|P_t|) + \max(-F_t, 0),$$

$$a_P^0 = \frac{\rho_P^0}{\Delta t} \Delta x \Delta y \Delta z, \quad (15)$$

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + a_B + a_T + a_P^0 - Sp \Delta x \Delta y \Delta z, \quad (16)$$

$$b = Su \Delta x \Delta y \Delta z + a_P^0 \Phi_P^0. \quad (17)$$

Или в другой форме:

$$[a_P + Sp] \Phi_P = a_W \Phi_W + a_E \Phi_E + a_S \Phi_S + a_N \Phi_N + a_B \Phi_B + a_T \Phi_T + Su, \quad (18)$$

где

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + a_B + a_T, \quad (19)$$

$$Sp = \frac{\rho_P^0}{\Delta t} \Delta x \Delta y \Delta z + Sp \Delta x \Delta y \Delta z, \quad (20)$$

$$Su = Su \Delta x \Delta y \Delta z + \Phi_P^0 \left[\frac{\rho_P^0 \Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} \right]. \quad (21)$$

В выражениях (20) и (21) члены Su и Sp , стоящие в правой части, сформированы в ходе линеаризации источникового члена исходного уравнения, а Su и Sp в правой части следует понимать в новом смысле. Указанные величины играют большую роль при постановке граничных условий, а также в задании итерационной схемы для решения задачи (20).

На рис. 2 представлена модель области проведения численного эксперимента. На нем обозначены основные грани, на которых требуется задание граничных условий. Грани front и back представляют соответственно области втекания и истечения атмосферного воздуха, а остальные внешние грани считаются непроницаемыми. Грани поверхностей зданий (l, r, f, bc, b, t) являются также непроницаемыми.

Определим математические формулировки граничных условий [2].

На грани front: $u = u_{in}$, $v = 0$, $w = 0$;

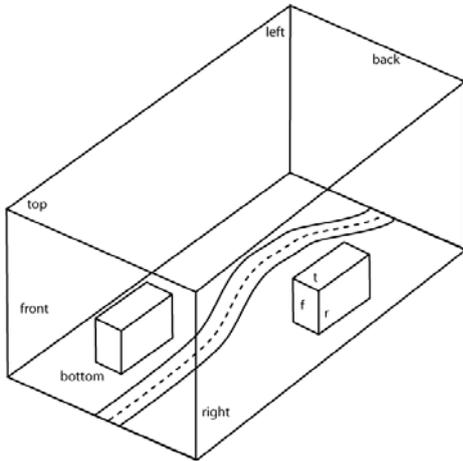


Рис. 2. Схема области моделирования

на грани back: $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$, $v = 0$,

$w = 0$;

на гранях left, right, top: $\frac{\partial u}{\partial n} = 0$,

$\frac{\partial v}{\partial n} = 0$, $\frac{\partial w}{\partial n} = 0$, где n – вектор внешней нормали к грани;

на грани bottom: $\frac{\partial u}{\partial n} = -\mu u$,

$\frac{\partial v}{\partial n} = -\mu v$, $\frac{\partial w}{\partial n} = 0$, где μ – коэффициент трения о подстилающую поверхность;

$\Phi = u, v, w$, где u , v и w – компоненты вектора скорости в направлениях Ox , Oy и Oz соответственно.

Контрольные объемы, занимаемые постройками, помечаются как области с высокой вязкостью. Счет в них осуществляется так же, как в областях с нормальной вязкостью.

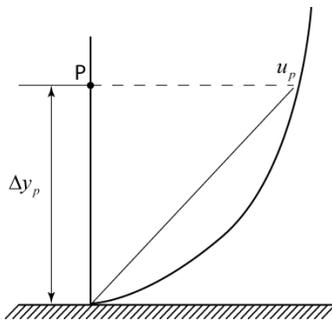


Рис. 3. Профиль вектора скорости вблизи стены

Учет граничных условий в численной модели происходит с помощью коэффициентов Sp и Su . Например, в уравнении (18) при $\Phi = u$ получаем:

на грани front: $Su = Su + a_w u_{in}$,

$Sp = Sp + a_w$, $a_w = 0$,

на грани back: $a_E = 0$.

Задание граничных условий на гранях left, right, top, bottom с учетом трения рассмотрим более подробно. На рис. 3 пред-

ставлена схема поведения компоненты скорости u вблизи стены

Предполагается, что движение среды вблизи стены ламинарное. Тогда коэффициент напряжения имеет вид:

Тогда сила трения выражается в виде:

$$\tau_w = \mu \frac{u_p}{\Delta y_p} \tag{19}$$

$$F_s = -\tau_w A = -\mu \frac{u_p}{\Delta y_p} A \tag{20}$$

где μ – коэффициент трения о стену, u_p – значение скорости в пристеночном узле.

Формулы (19) и (20) получены при условии линейного изменения модуля скорости от дистанции до стены.

Тогда в разностной схеме учет граничного условия осуществляется с помощью введения фиктивного источника:

$$Sp = -\frac{\mu}{\Delta y_p} A \cdot$$

Согласно SIMPLE-методу, в задаче определения поля скоростей требуется модифицировать универсальную схему.

На рис. 4 приведен пример контрольного объема для компоненты скорости u . Запишем универсальное уравнение (13) для $\Phi = u$ в точке w :

$$a_w u_w = \sum a_{nb} u_{nb} + b + (p_w - p_p) A_w \tag{21}$$

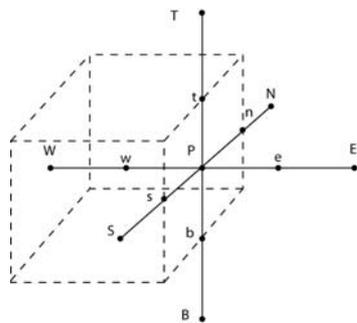


Рис. 4. Пример контрольного объема для компоненты скорости u

где a_{nb} и u_{nb} – значения коэффициентов в соседних узлах, b – правая часть соответствующего уравнения для $\Phi = u$, p_w и p_p – значение давления в точках P и W , A_w – площадь поверхности, на которую действует перепад давления ($A_w = \Delta y \Delta z$).

Запишем (21) для приближенного поля давления p^* и компоненты скорости u_w^* :

$$a_w u_w^* = \sum a_{nb} u_{nb}^* + b + (p_w^* - p_p^*) A_w \tag{22}$$

Предположим, что истинное поле давления связано с приближенным соотношением $p = p^* + p'$. Необходимо выяснить, как будут изменяться соответствующие компоненты скорости:

$$u = u^* + u', \quad v = v^* + v', \quad w = w^* + w' \tag{23}$$

Вычтем из (24) (25), тогда при u' получим соотношение:

$$a_w u_w' = \sum a_{nb} u_{nb}' + b + (p_w' - p_p') A_w \tag{24}$$

Член $\sum a_{nb}u'_{nb}$ согласно методу SIMPLE можно отбросить. В итоге получим выражение для поправки скорости u' :

$$u'_w = d_w (p'_w - p'_p), \quad (25)$$

где $d_w = A_w / a_w$.

Тогда поправочная формула для скорости может быть переписана в виде:

$$u_w = u_w^* + d_w (p'_w - p'_p). \quad (26)$$

Подставляя соответствующие компоненты скорости в (12), можно получить уравнение для отыскания поправки к давлению:

$$a_p p'_p = a_w p'_w + a_E p'_E + a_S p'_S + a_N p'_N + a_B p'_B + a_T p'_T + b, \quad (27)$$

где

$$\begin{aligned} a_w &= \rho_w d_w \Delta y \Delta z, \quad a_E = \rho_e d_e \Delta y \Delta z, \quad a_S = \rho_s d_s \Delta x \Delta z, \quad a_N = \rho_n d_n \Delta x \Delta z, \\ a_B &= \rho_b d_b \Delta x \Delta y, \quad a_T = \rho_t d_t \Delta x \Delta y, \quad a_p = a_w + a_E + a_S + a_N + a_B + a_T, \\ b &= \frac{(\rho_p^0 - \rho_p) \Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} + [(\rho u^*)_w - (\rho u^*)_e] \Delta y \Delta z + [(\rho v^*)_s - (\rho v^*)_n] \Delta z \Delta x + \\ &+ [(\rho w^*)_b - (\rho w^*)_t] \Delta x \Delta y \end{aligned} \quad (28)$$

Так как значения плотности заданы в точках P, то для отыскания их на гранях контрольных объемов необходимо прибегнуть к соответствующей интерполяции.

Граничные условия для уравнения (27) формулируются в виде $p' = 0$.

Задача распространения вредной примеси формулируется на базе универсальной формы записи уравнений переноса при $\Phi = \varphi$.

$$[a_p + Sp] \varphi_p = a_w \varphi_w + a_E \varphi_E + a_S \varphi_S + a_N \varphi_N + a_B \varphi_B + a_T \varphi_T + Su. \quad (30)$$

φ образует контрольный объем с центром в точке P.

К уравнению присоединяется начальное условие $\varphi = \varphi_0$ (фоновое загрязнение перед началом моделирования).

Граничные условия:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0 \quad - \text{условие беспрепятственного ухода примеси за пределы области мо-}$$

делирования, $\frac{\partial \varphi}{\partial z} = \alpha \varphi$ – условие поглощения подстилающей поверхностью примеси.

Коэффициенты Sp и Su формулируются с учетом граничных условий и наличия источников загрязнения в исследуемой области [4, 5].

Для параллельной реализации схемы [3] используется известный метод декомпозиции. Количество подобластей равняется числу задействованных узлов на кластере распределенных вычислений. На рис. 5 представлена схема деления области на подобласти.

В каждой подобласти соответствующим узлом кластера реализуется расчет необходимого дискретного уравнения. Между границами подобластей производятся обмены приграничными элементами из-за специфики шаблона разностной схемы. Функции, реализующие обмен данными между различными компьютерными блоками кластера, реализованы с помощью библиотеки MPI.

Вычислительный эксперимент был проведен для разного размера сеток и количества задействованных процессоров. В табл. 3 приведены результаты эффективности алгоритма.

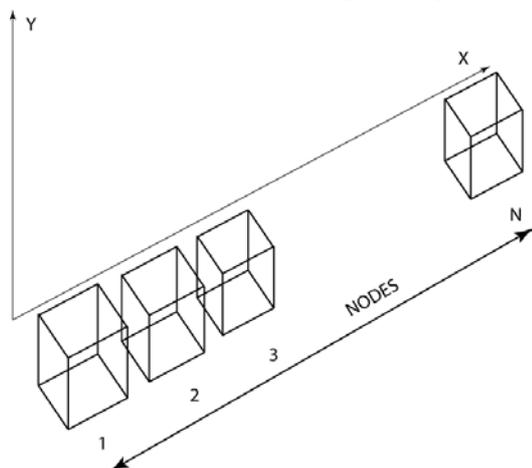


Рис. 5. Схема деления области на подобласти

Численный эксперимент проводился для участка улично-дорожной сети города Таганрога с захватом близлежащих кварталов. На рис. 6 представлены результаты моделирования при следующих условиях: интенсивность подвижных источников (автотранспортного потока) 1200 единиц/час, загрязняющая примесь – однокомпонентный газ CO, скорость движения 30 км/ч, мощность выбросов 5,5 мг/(с/км), ветер восточный 5 м/с, температура 15⁰ С, давление 750 мм. р. ст. Номерам изолиний соответствуют следующие концентрации на высоте 1 м.:

3 – 2,1 мг/м³, 4 – 0,7 мг/м³.

1 – 6,2 мг/м³, 2 – 5,1 мг/м³,



Рис. 6. Результаты моделирования

В работе предложен алгоритм решения задачи распространения загрязняющих веществ от автотранспортных средств в условиях реальной городской застройки.

Эффективность алгоритма		
p/N	151x646x20	800x600x20
2	0,72	0,851
4	0,73	0,823
6	0,712	0,8
8	0,67	0,74

Численная реализация основана на использовании универсальной дискретной схемы, которая позволяет в процессе вычисления подбирать оптимальные аппроксимации конвективным членам для усиления устойчивости алгоритма. Данный подход позволяет упростить процесс моделирования и увеличить точность за счет использования информации о дополнительных факторах, поведение которых описывается с помощью универсального уравнения переноса. Построен параллельный алгоритм и представлены результаты моделирования для одного из перекрестков улично-дорожной сети города Таганрога.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Берлянд М. Е. Прогноз и регулирование загрязнений атмосферы. – Л.: Гидрометеоиздат, 1985. – 271 с.
2. Марчук Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. – М.: Наука, 1982. – 319 с.
3. Корнеев В. В. Параллельные вычислительные системы. – М.: Ноледж, 1999.
4. Методика расчетов выбросов в атмосферу загрязняющих веществ автотранспортом на городских магистралях. – М.: НИИАТ, 1997. – 54 с.
5. Матвеев Л. Т. Физика атмосферы. – СПб.: Гидрометеоздат, 2000. – 779 с.
6. Патанкар С. В. Численные методы решения задач обмена и динамики жидкости. – М.: Энергоатомиздат, 1984. – 152 с.

Сухинов Александр Иванович

Технологический институт федерального государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Южный федеральный университет» в г. Таганроге;

E-mail: suchinov@gmail.com

347928, Россия, Таганрог, ГСП 17А, пер. Некрасовский, 44

Тел.: 8(8634)371606

Гадельшин Валерий Камельянович

E-mail: suchinov@gmail.com

Любомищенко Денис Сергеевич

E-mail: suchinov@gmail.com

Suchinov Alexander Ivanovich

Taganrog Institute of Technology - Federal State-Owned Educational Establishment of Higher Vocational Education "Southern Federal University"

E-mail: suchinov@gmail.com

44, Nekrasovsky, Taganrog, 347928, Russia, Ph.: +7(8634)37-16-06

Gadelshin Valeriy Kameljanovich

E-mail: suchinov@gmail.com

Lubomishenko Denis Sergeevich

E-mail: suchinov@gmail.com

УДК 519.8:533

Б. В. Сидоренко

MRT LATTICE BOLTZMANN МЕТОД В МОДЕЛИРОВАНИИ ГИДРОДИНАМИКИ МЕЛКОВОДНЫХ ВОДОЕМОВ

В данной работе рассматриваются MRT Lattice Boltzmann модели в вычислительной гидродинамике. С их помощью проводятся численные эксперименты для реальных водоемов. При численном моделировании была задействована D3Q19 модель, которая была модифицирована для некубических сеток, то есть с преобладанием какого-то шага по пространству. MRT модели показали высокую скорость вычислений и хорошую устойчивость к входным параметрам.

Решеточное уравнение Больцмана; Решеточный метод Больцмана; одиночная релаксационная модель; многовременная релаксационная модель; Граничные условия отскока.

B.V. Sidorenko

MRT LATTICE BOLTZMANN METHOD IN FLUID DYNAMICS FOR SHALLOW WATER BASINS

In the work MRT Lattice Boltzmann model in CFD are considered. With their help numerical experiments for real basins are made. At numerical modeling used D3Q19 model which has been modified for not cubic grids, that is with prevalence of one of step in space. MRT models have shown: high speed of calculations and stability against entrance parameters.

LBE; LBM; LB-BGK; Lattice Boltzmann; MRT; Bounce Back BC.

Введение

Lattice Boltzmann метод (LBM), использующий минимальные дискретные кинетические модели для решения задач в механике жидкости и других областях физики, привлекает большое внимание в последние годы [1–4]. Вместо прямого решения уравнений Навье-Стокса LBM включает в себя решение решеточного уравнения Больцмана (LBE), которое описывает развитие распределения ансамбля частиц на решетке, коллективное поведение которых асимптотически представляет собой динамику течения жидкости. Как показано при решении LBE, в пределе получаются течения жидкости, представляемые слабо сжимаемыми уравнениями Навье-Стокса.

Эффекты столкновения частиц при решении LBE вообще представляют собой релаксационные модели. Одна из наиболее общих – это одновременная релак-